

**PROPOSITION DE SUJET DE THESE 2008**

**Titre du sujet : Etude de l'adsorption de molécules simples sur WO<sub>3</sub> par des calculs ab initio. Application à la détection des gaz**

L'équipe micro-capteurs de l'IM2NP développe des capteurs de gaz dont le principe de détection est basé sur la mesure de la variation de la conductance en présence de gaz. Le matériau utilisé comme élément sensible est l'oxyde de tungstène (WO<sub>3</sub>) en couches minces. Tout comme SnO<sub>2</sub>, ZnO ou TiO<sub>2</sub>, le WO<sub>3</sub> fait partie des oxydes semi-conducteurs couramment utilisés dans ce type d'application. Il est sous-stœchiométrique en oxygène. Cette propriété est justement à la base du fonctionnement des capteurs. Bien comprendre le rôle de ces lacunes est fondamental, pour profiter pleinement des qualités de détection de ces matériaux, et pour permettre de lever le verrou de la sélectivité, présent dans la plupart des oxydes. Notre équipe mène plusieurs travaux théoriques et expérimentaux complémentaires dans ce domaine. Nous avons étudié dans un premier temps la formation d'une lacune neutre d'oxygène en volume par des calculs ab-initio basés sur la DFT, dans les approximations LDA et GGA. Puis nous avons simulé la surface c (2x2), obtenue par clivage selon la direction [001] et la suppression d'une rangée sur deux d'atomes d'oxygène selon la direction [110]. Cette reconstruction est la plus favorable énergétiquement, bien que d'autres reconstructions soient possibles. L'objet de la thèse sera d'étudier l'adsorption de molécules de gaz simples (O<sub>2</sub> dans un premier temps, puis CO) pour cette reconstruction, mais également pour des surfaces plus ou moins riches en oxygène. Le nombre d'atomes à considérer étant au minimum de 64 pour simuler ces systèmes, nous avons fait le choix du code Siesta pour mener à bien ces études. Ce code permet d'effectuer des calculs et de la structure électronique moléculaire ab initio et des simulations de la dynamique des molécules et des solides. Il présente l'avantage de pouvoir travailler avec un nombre d'atomes plus important que dans les autres codes, et permet de rendre compte de manière fiable de l'interaction gaz – capteur.

Financement envisagé : Bourse MESR (ED353)

Contacts : **Khalifa Aguir**, Université Paul Cézanne

Courriel : [khalifa.aguir@l2mp.fr](mailto:khalifa.aguir@l2mp.fr)

Tél : 04 91 28 89 72

**IM2NP**

UMR 6242 CNRS – Universités d'Aix-Marseille Paul Cézanne, Provence et Sud Toulon Var  
Département Micro & Nanoélectronique



CENTRE NATIONAL  
DE LA RECHERCHE  
SCIENTIFIQUE

